

## ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ХРИЗИНА С ИОНАМИ КАЛЬЦИЯ

Нуркадыров Д.К.<sup>(1)</sup>, Пустолайкина И.А.<sup>(2)</sup>, Мукушева Г.К.<sup>(1)</sup>,  
Абсат З.Б.<sup>(2)</sup>, Адекенов С.М.<sup>(1)</sup>

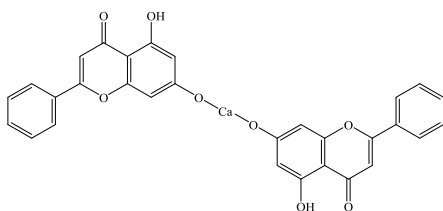
<sup>(1)</sup> АО «Международный научно-производственный холдинг “Фитохимия”»  
100009, г. Караганда, ул. М. Газалиева, д. 4

<sup>(2)</sup> Карагандинский государственный университет  
100028, г. Караганда, ул. Университетская, д. 28

Хризин ( $C_{15}H_{10}O_4$ ; 5,7-дигидроксифлавонон) - растительный флавоноид, используется спортсменами для улучшения физического состояния и восстановления гормонального баланса. Практически нерастворим в воде. Проблема растворимости и биологической доступности хризина может быть решена в результате получения его комплексов с ионами различных металлов. Экспериментально был получен комплекс хризина с ионами  $Ca(II)$ . Однако, структура полученного комплекса не была однозначно идентифицирована.

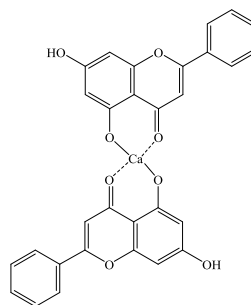
Целью настоящего исследования является квантово-химическое моделирование и идентификация комплексов хризина с ионами  $Ca(II)$ .

Молекула хризина содержит две гидроксильных группы, протоны которых могут вступать в реакцию обмена с ионами кальция. Неэмпирическим методом UHF в базисе 6-31G с помощью программного комплекса Gaussian-2009 в результате расчетов с оптимизацией всех геометрических параметров было получено две возможных конфигурации комплекса хризина с ионами  $Ca(II)$  (см. рисунки). Показано, что Комплекс 2 термодинамически более стабилен.



Комплекс 1

Структура комплексов хризина с  $Ca(II)$



Комплекс 2

В образовании Комплекса 1 участвуют две свободных гидроксильных группы хризина. Его идентификация возможна по наличию в ИК-спектре комплекса частоты, соответствующей валентным колебаниям ОН-группы с внутримолекулярной водородной связью. Комплекс 2 характеризуется хелатной структурой. Его идентификация возможна по наличию в ИК-спектре частоты, соответствующей валентным колебаниям свободной ОН-группы.